W ogólności zasadę nieoznaczoności trzeba rozpisać oddzielnie dla każdej składowej przestrzennej x,y,z:

$\Delta p_x \Delta x \geq h$; $\Delta p_y \Delta y \geq h$; $\Delta p_z \Delta z \geq h$	(38)

Korzystając z odpowiedniego aparatu matematycznego można wykazać, że również :

$\Delta L \Delta \theta \geq h$ oraz $\Delta E \Delta t \geq h$	(39)

czyli: nie można dowolnie dokładnie wyznaczyć równocześnie:
- momentu pędu i współrzędnej kątowej (obrotowej) cząstki, jak również
- energii i czasu (np. dokładnej wartości poziomu energetycznego i czasu przebywania na nim cząstki).

Wymienione pary wielkości fizycznych nosza nazwę *wielkości kanonicznie sprzężonych*.

8. Równanie Schrödingera

Widzieliśmy, że cząstkom trzeba przypisać własności falowe. Uwzględniamy to wprowadzając tzw. funkcję falową Ψ. Jest to ogólnie biorąc funkcja współrzędnych przestrzennych oraz czasu : $\Psi = \Psi(x, y, x, t) = \Psi(\mathbf{r}, t)$. Funkcja ta może przyjmować wartości zespolone, które nie mają bezpośredniego znaczenia fizycznego. Istotne znaczenie ma $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$:

$$\Psi\Psi^* = |\Psi|^2 = p$$

$p(\mathbf{r}, t)$ jest gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w chwili t i w punkcie **r**=[x,y,z]. Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w elemencie objętości ΔV=ΔxΔyΔz przestrzeni wynosi:

$$P = p\Delta V = |\Psi|^2 \Delta x \Delta y \Delta z .$$

Zgodnie z definicją prawdopodobieństwa :

$$\int\limits_{\substack{cala \\ przestrze\acute{n}}} |\Psi|^2 dV = 1$$ (pewność, że cząstka jest gdziekolwiek)

Jest to warunek normalizacji.

Funkcja Ψ opisuje zatem zachowanie się cząstek w sposób statystyczny podając tylko prawdopodobieństwo zajmowania przez nie określonych miejsc w przestrzeni: Żeby mieć tą funkcję, trzeba rozwiązać równanie Schrödingera dla danego zagadnienia..
Równanie Schrödingera nie można udowodnić (podobni jak zasad Newtona). Można je tylko zapostulować, przez analogie z równaniem falowym. Niemniej wnioski wyciągnięte na jego podstawie potwierdzając charakter prawa przyrody.

Ograniczymy sie tutaj tylko do niezależnego od czasu równania Schrödingera. Opisuje ono wszystkie sytuacje, w których potencjał oddziaływania rozważanej cząstki (lub układu) z otoczeniem nie zależy od czasu.
Równanie to ma postać:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi \qquad (40)$$

gdzie: E jest całkowita energią cząstki, U - jej energią potencjalną, m - masą, zaś $\Delta\psi$ - tzw. laplasjanem funkcji falowej:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \Delta\psi$$

Rozwiązania uzyskiwane z niezależnego od czasu równania Schrödingera są rozwiązaniami dla tzw. stanów stanów stacjonarnych (czyli niezależnych od czasu). Oczywiście wyliczona gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki - $\psi\psi^*$ - nie zależy od czasu.

Zauważmy, że niezależne od czasu równanie Schrödingera możemy też przedstawić jako:

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (41)$$

gdzie : $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$ jest operatorem zwanym hamiltonianem. Zauważmy, że w

Równ. 41 zadziałanie operatorem $\hat{H}$ na funkcję ψ daje w wyniku energię całkowitą

E. Dlatego operator $\hat{H}$ nazywamy operatorem energii całkowitej.

Ogólnie w mechanice kwantowej wiele wielkości fizycznych, charakteryzujących cząstkę wyliczamy w analogiczny sposób:

$$\hat{\mathrm{F}}\Psi_n = \mathrm{f}_n\Psi_n \qquad (42)$$

gdzie $\hat{\mathrm{F}}$ jest operatorem dla wielkości f (zaś Ψ_n opisują tzw. stany własne cząstki).

Na zakończenie, przekształćmy jeszcze równanie Schrödingera (Równ. 40) do innej postaci, łatwej do zapamiętania:

$$E\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi \;\rightarrow\; (\mathrm{E}-\mathrm{U})\,\psi = \frac{-\hbar^2}{2\mathrm{m}}\Delta\psi$$

lecz różnica energii całkowitej i potencjalnej daje energię kinetyczną: $E-U = E_k$; a zatem:

$$E_k\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi \qquad (43)$$

Przypomnijmy relacje między długością fali i pędem oraz definicję liczby falowej:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Z obu tych związków wynika, że: $p = \hbar k$. Pamiętając, że energia kinetyczna $E_k = \frac{p^2}{2m}$, a zatem $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ i podstawiając do Równ. 43 otrzymamy:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi$$

lub:

$$k^2\psi = -\Delta\psi$$

A zatem:

$\Delta\psi + k^2\psi = 0$	(44)

Jest to równoważna postać niezależnego od czasu równania Schrödingera, która będzie przydatna w ponizszych przykładach.

9. Przykłady rozwiązywania równania Schrödingera

9.1. Cząstka swobodna:

Na cząstkę swobodna nie działają żadne siły zewnętrzne, a zatem jej energia potencjalna U(x,y,z)=0. Niech rozważana cząstka porusza się w kierunku osi x i niech jej energia kinetyczna wynosi E_k:

$$E_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_k} \quad \text{(k=const)}$$

Pęd, a zatem i liczba falowa (k) jest dla tej cząstki stała.
Użyjemy zatem równania Schrödingera w postaci danej Równ. 44:

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0$$

Rozwiązaniem tego równania jest:

$\psi = Ae^{ikx}$	(45)

co jest równoważne:

$\psi = A(\cos kx + i\sin kx)$	(46)

Rozwiązanie powyzsze opisuje ruch w kierunku dodatniej wartości osi x. Natomiast dla ruchu cząstki swobodnej w kierunku ujemnej wartości osi x mamy:

$\psi = Ae^{-ikx}$	(47)

lub równoważnie:

$\psi = A(\cos kx - i\sin kx)$	(48)

Zauważmy, że $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = A^2$=const.
Oznacza to, że prawdopodobieństwo napotkania cząstki jest jednakowe w każdym punkcie osi x. Inaczej mówiąc, położenie cząstki swobodnej jest nieokreślone. Jest to potwierdzenie zasady nieoznaczoności: w rozważanym przypadku E_{kin} i p są dokładnie